

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ СПЛАВОВ $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

Ноговицына Т.А.<sup>1\*</sup>, Бессонов С.А.<sup>1</sup>, Повзнер А.А.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [t.a.nogovitsyna@urfu.ru](mailto:t.a.nogovitsyna@urfu.ru)

## ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETIC SUSCEPTIBILITY OF ALLOYS $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

Nogovitsyna T.A.<sup>1\*</sup>, Bessonov S.A.<sup>1</sup>, Povzner A.A.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Ab initio calculations of the electronic structure of  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  alloys have been supplemented with the consideration of fluctuations of the spin density of collective d electrons with the Hubbard interactions at Fe and Co atoms randomly distributed over sites. The magnetic-state equation in the developed model describes helicoidal ferromagnetism and its disappearance accompanied by the occurrence of a maximum of magnetic susceptibility at temperature  $T_C$  and spin helix fluctuations at  $T > T_C$ .

LDA+U+SO - расчеты электронной структуры геликоидальных ферромагнетиков  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  в приближении виртуального кристалла, дополнены учетом взаимодействия Дзялошинского – Мория, а также учетом различия кулоновских потенциалов железа и кобальта, хаотически распределенных по узлам кристаллической решетки. Уравнение магнитного состояния в развитой модели учитывает взаимодействие между флуктуационными модами, возникающее в области магнитного фазового перехода, описывает геликоидальный ферромагнетизм и область флуктуаций спиновой спирали, в которой при включении внешнего магнитного поля формируются скирмионные состояния.

Показано, что изменение знака коэффициента межмодовой связи, обусловленное близостью химического потенциала к области энергий с большой положительной кривизной плотности состояний, ведет к магнитному фазовому переходу, сопровождаемому исчезновением геликоидального ферромагнетизма. При температуре фазового перехода вследствие изменения знака параметра межмодового взаимодействия формируется максимум на температурной зависимости магнитной восприимчивости сплавов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ .